

Computational modeling of semiconductor nanostructures for optoelectronics

Doctoral Thesis**Author(s):**

Veprek, Ratko G.

Publication date:

2009

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005917536>

Rights / license:

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Diss. ETH No. 18424

Computational Modeling of Semiconductor Nanostructures for Optoelectronics

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by
RATKO G. VEPREK
Dipl. Rech. Wiss. ETH
born 07 04 1978
citizen of Switzerland

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Bernd Witzigmann, examiner
Prof. Dr. Aldo Di Carlo, co-examiner

2009

Abstract

The application of computer simulations to scientific and engineering problems has matured to a fundamental research tool over the last decades. Hereby, continuous scientific advances require the ongoing creation and improvement of scientific simulation software. In the field of optoelectronics, *Technology CAD* (TCAD) has been established as a paramount tool for the understanding and improvement of device behavior. With the recent advances in fabrication technology, nanostructures exhibiting pronounced quantum mechanical effects can be fabricated, providing a promising potential to improve contemporary and future devices.

This thesis deals with the theory and its numerical implementation of a novel simulator *tdkp/AQUA*, suitable for the unified simulation of nanostructures for optoelectronics of any dimensionality. While carrier transport and capture effects are presented by Steiger [1], this thesis covers the calculation of the electronic band structure and the optical properties of nanostructures.

Treating nanostructures of different dimensionality using an unified approach necessitates appropriate simplifications of the fundamental physics. Therefore, the presented theory is based on a continuum formulation of the physical behavior of the involved semiconductor crystal. As a result, general partial differential equations are obtained, which are numerically discretized using finite elements. The simulator has been designed to encompass the decisive physical effects defining the nanostructures electronic and optical properties.

As such, strains caused by the lattice mismatch of involved materials are calculated using small-strain linear elasticity. The determined strain distributions are used to calculate polarization induced charges via the piezoelectric effect. Both, strain and polarization effects are subsequently included in the electronic band structure calculation, which is based on the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ envelope function method. As a central novelty, the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ envelope function method is formulated absolutely spurious solution free by ensuring a mathematical consistent formulation retaining the elliptical nature of the equation. This elliptical formulation is achieved using *Burt–Foreman* operator ordering in conjunction with appropriate constraints for the input material parameters. The effect of crystal strain is incorporated into the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Hamiltonians using the theory of *Pikus–Bir*. Strain-dependent effective masses are naturally included in the designated band structure. The band structures are then used to calculate spontaneous and stimulated emission of nanostructures and bulk crystals using a density matrix approach, self-consistently coupling a classical electro-magnetic field to the quantum kinetic microscopic polarization. Many-body effects due to Coulomb interactions between charge carriers are included on the level of the screened Hartree-Fock theory.

This thesis aims to consistently present the underlying theory and its numerical formulation in the first chapters, covering general numerical and implementation related issues in subsequent chapters. At last, simulation examples are given, outlining possible applications of the developed simulator.

Zusammenfassung

Computersimulationen haben sich über die letzten Dekaden hinweg zu einem fundamentalen Werkzeug des Erkenntnisgewinns in wissenschaftlichen und technischen Fragestellungen entwickelt. Der laufende wissenschaftliche Fortschritt erfordert die beständige Verbesserung und Neuentwicklung der dabei eingesetzten Programme. Im Fachgebiet der Elektronik und Optoelektronik ist der Einsatz der rechnergestützten Konzeption und Analyse der Bauteile, englisch als *Technology CAD* (TCAD) bezeichnet, weit verbreitet. Die fortschreitende Weiterentwicklung der Halbleitertechnologie ermöglicht mittlerweile die gezielte Anfertigung von Nanostrukturen, welche durch ihre kleine Ausdehnung zutiefst quantenmechanischen Phänomenen unterliegen. In der gezielten Nutzbarmachung der quantenmechanischen Effekte liegt ein enormes Verbesserungspotential aktueller und zukünftiger optoelektronischer Bausteine.

Diese Dissertation behandelt die Theorie und die numerische Implementation eines neuen Programms, *tdkp/AQUA* genannt, welches zum Zweck der einheitlichen Simulation von Nanostrukturen beliebiger Dimensionalität in optoelektronischen Anwendungen entwickelt wurde. Hierbei wird in dieser Dissertation auf die Berechnung der elektronischen Bandstruktur und der optischen Eigenschaften eingegangen, während der Transport und Einfang der Ladungsträger von Steiger [1] an anderer Stelle beschrieben wird.

Der Ansatz einer einheitlichen Beschreibung der Nanostrukturen erfordert die Einführung verschiedener Vereinfachungen der zugrun-

deliegenden Physik. Zu diesem Zweck basiert die vorliegende Arbeit auf einer Kontinuumsformulierung der physikalischen Eigenschaften des betrachteten Halbleiterkristalls. Daraus ergeben sich partielle Differentialgleichungen, welche numerisch mit der Methode der Finiten Elemente gelöst werden können. Das Programm wurde darauf ausgelegt, die für die elektronischen und optischen Eigenschaften dominanten physikalischen Effekte ausreichend zu berücksichtigen. Diesbezüglich werden die durch Gitterfehlanelastizitäten der involvierten Materialien induzierten Verspannungen mit der linearen Elastizitätstheorie berechnet. Aus den damit berechneten Verspannungsfeldern werden anschliessend die durch den piezoelektrischen Effekt induzierten Polarisationsladungen und das dazugehörige elektrostatische Potential bestimmt. Die Verspannung und das elektrostatische Potential fliessen danach in die Berechnung der elektronischen Bandstruktur ein. Die elektronische Bandstruktur wird in der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Einhüllendenapproximation bestimmt. Eine zentrale Neuerung hierbei ist die mathematisch stabile, elliptische Formulierung der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Einhüllendenapproximation, welche nicht von der Existenz von unechten Lösungen betroffen ist. Die stabile, elliptische Form der Gleichungen wird durch die Kombination der Burt-Foreman Operatorenordnung und bestimmter Anforderungen an die Materialparameter erreicht. Der Einfluss der Verspannung auf den $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonoperator und auf die entsprechende Bandstruktur wird im Rahmen der Theorie von Pikus und Bir behandelt, wobei auch verspannungsabhängige effektive Massen auf natürliche Weise mitberücksichtigt werden. In einem weiteren Schritt werden auf Basis der berechneten Bandstruktur die spontane und stimulierte Emission der Nanostrukturen oder makroskopischer Gebiete berechnet. Die Berechnung basiert auf einem Dichtematrixansatz mit selbstkonsistenter Kopplung eines klassischen elektromagnetischen Feldes mit der quantenkinetischen mikroskopischen Polarisation. Vielteilcheneffekte aufgrund der Coulombwechselwirkung werden im Rahmen der abgeschirmten Hartree-Fock Theorie miteinbezogen.

Diese Dissertation beabsichtigt in den ersten Kapiteln die implementierte Theorie mitsamt numerischer Formulierung konsistent,

zugänglich und ausführlich zu präsentieren. Generelle numerische und implementationsspezifische Aspekte werden in den anschliessenden Kapiteln behandelt. Zum Abschluss werden Simulationsbeispiele und Anwendungen gezeigt, welche auch der Illustration der möglichen Anwendungsgebiete des implementierten Programms dienen.